

Векторные (вероятностно-алгебраические) алгоритмы метода Монте-Карло

Михайлов Г. А., Медведев И. Н., Ухинов С. А.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
Новосибирск; sau@osmf.sscs.ru

Векторные алгоритмы метода Монте-Карло используются для решения систем интегральных уравнений. Их характерной особенностью является матричный вес, который после каждого перехода в моделируемой цепи Маркова домножается на матрицу ядер системы, поделенных на переходную плотность. Такие алгоритмы можно называть вероятностно-алгебраическими. На основе векторно-стохастических физических моделей были построены векторный алгоритм решения системы уравнений *переноса излучения с учетом поляризации* и векторный алгоритм решения *многогрупповых уравнений переноса*. В результате обобщения таких алгоритмов на решение систем интегральных уравнений 2-го рода было проведено исследование несмещенности и конечности дисперсий указанных "физических" векторных оценок, а так же построены алгоритм *сочетания метода Монте-Карло с методом конечных сумм*, и стохастические алгоритмы решения *метагармонического уравнения* и *векторного уравнения Гельмгольца*. Особенно эффективным является векторное представление и на его основе обоснование стохастических оценок кратных параметрических производных. При этом особую роль играет специально сформулированная теорема о том, что спектральный радиус треугольного матрично-интегрального оператора не превосходит максимума спектральных радиусов интегральных операторов, расположенных на диагонали.

На основе недавно сформулированного двойственного представления средних квадратов оценок линейных функционалов осуществлена минимизация мажорантной среднеквадратической погрешности глобальной оценки решения типа гистограммы.

Система интегральных уравнений второго рода:

$$\phi_i(x) = \sum_{j=1}^m \int_X k_{ij}(x, y) \phi_j(y) dy + h_i(x) \quad (1)$$

или $\Phi = \mathbf{K}\Phi + H$, где $H^T = (h_1, \dots, h_m)$, $\Phi^T = (\phi_1, \dots, \phi_m)$,

$$\mathbf{K} \in [L_\infty \rightarrow L_\infty], \quad \|\mathbf{K}\|_{L_\infty} = \text{vrai} \sup_{i,x} |h_i(x)|,$$

а интегрирование производится по мере Лебега в κ -мерном евклидовом пространстве X .

Спектральный радиус

$$\rho(\mathbf{K}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \|\mathbf{K}^n\|^{1/n} = \inf_{n \geq 1} \|\mathbf{K}^n\|^{1/n} < 1,$$

$$\|\mathbf{K}\| = \text{vrai} \sup_{x,i} \sum_{j=1}^m \int |k_{ij}(x, y)| dy.$$

Цепь Маркова $\{x_n\}, (n = 0, \dots, N)$ с плотностью перехода $p(x, y)$, причем

$$p(x) = 1 - \int_X p(x, y) dy \geq 0$$

– вероятность обрыва (остановки) в точке x , N –случайный номер последнего состояния, $x_0 \equiv x$. Такая цепь обрывается с вероятностью 1 и более того, $E(N) < +\infty$, если $\rho(B_p) < 1$, где B_p – интегральный оператор с ядром $p(x, y)$ (в частности, если $p(x) \geq \varepsilon > 0$).

Стандартная векторная оценка ξ_x метода Монте-Карло

$$\Phi(x) = E\xi_x, \quad \xi_x = H(x) + \sum_{n=1}^N Q_n H(x_n) = H(x) + \delta_x Q_1(x, x_1) \xi_{x_1},$$

$$Q_0 = I, \quad Q_{n+1} = Q_n K(x_n, x_{n+1}) / p(x_n, x_{n+1}) \quad n = 0, 1, \dots,$$

где I – единичная матрица, $x_0 = x$, $K(x, y)$ – матрица ядер $\{k_{ij}(x, y)\}, (i, j = 1, \dots, m)$; δ_x – “индикатор выживания”. Соотношение $\Phi(x) = E\xi_x$ справедливо при выполнении стандартного “условия несмещенности”

$$p(x, y) > 0, \quad \text{если} \quad \sum_{i,j=1}^m |k_{ij}(x, y)| > 0$$

и дополнительного условия $\rho(\mathbf{K}_1) < 1$, где \mathbf{K}_1 – оператор, получаемый из оператора \mathbf{K} заменой ядер на их модули [1].

Уравнение для матрицы вторых моментов $\Psi(x) = E(\xi_x \xi_x^T)$:

$$\Psi(x) = [H\Phi^T + \Phi H^T - HH^T](x) + \int_X \frac{K(x, y)\Psi(y)K^T(x, y)}{p(x, y)} dy, \quad (2)$$

или $\Psi = \chi + \mathbf{K}_p \Psi$.

Осреднение по y и δ_x , следующего из соотношения

$$\xi_x \xi_x^T = H(x)H^T(x) + \delta_x Q(x, y) \xi_y H^T(x) + \delta_x H(x) \xi_y^T Q^T(x, y) + \delta_x Q(x, y) \xi_y \xi_y^T Q^T(x, y) \quad (3)$$

приводит к (2), но не исключает возможность $\|\Psi\| = +\infty$ даже, если $\lambda(\mathbf{K}_p) < 1$. Это затруднение преодолевается с помощью метода рекуррентного “частичного осреднения”:

$$\begin{aligned} \eta_{x_0} \eta_{x_0}^T &= \chi(x_0) + \delta_{x_0} Q(x_0, x_1) \xi_{x_1} \xi_{x_1}^T Q^T(x_0, x_1), \\ E(\eta_{x_0} \eta_{x_0}^T) &= E(\xi_{x_0} \xi_{x_0}^T). \end{aligned}$$

Пространство \mathbf{L}_∞ матричнозначных функций (иначе матриц-функций) с нормой

$$\|\Psi\| = \text{vrai sup}_{i,j,x} |\Psi_{i,j}(x)|.$$

Предполагается, что $\mathbf{K}_{p,1} \in [\mathbf{L}_\infty \rightarrow \mathbf{L}_\infty]$.

Утверждение. Пусть ядра системы (1) интегрируемы в $X \times Y$. Тогда

$$\|\mathbf{K}_p\|_{\mathbf{L}_\infty} = \text{vrai} \sup_{i,x} \int \frac{\left(\sum_{j=1}^m |k_{ij}(x,y)| \right)^2}{p(x,y)} dy. \quad (4)$$

Двойственное представление среднего квадрата векторной оценки линейного функционала.

$$J = (F, \Phi) = \int_X F^T(x) \Phi(x) dx,$$

где $F^T(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x))$, причем

$$\|F\|_{L_1} = \sum_{j=1}^m \int_X |f_j(x)| dx < \infty.$$

Пусть точка x_0 распределена с плотностью вероятностей $\pi_0(x)$ такой, что $\pi_0(x) \neq 0$, если $F^T(x) \Phi(x) \neq 0$. Тогда

$$J = E\zeta = E\left\{ \frac{F^T(x_0)}{\pi_0(x_0)} \boldsymbol{\xi}_{x_0} \right\} = E\left\{ \sum_{n=0}^N H^T(x_n) Q_n^T \frac{F(x_0)}{\pi_0(x_0)} \right\}.$$

$$\begin{aligned} E\zeta^2 &= E\{F^T(x_0) \boldsymbol{\xi}_{x_0} \boldsymbol{\xi}_{x_0}^T F(x_0) / \pi_0^2(x_0)\} = E\{F^T(x_0) \Psi(x_0) F(x_0) / \pi_0^2(x_0)\} = \\ &= \int_X \frac{F^T(x) \Psi(x) F(x)}{\pi_0(x)} dx. \end{aligned}$$

В частности, $D\zeta < +\infty$, если

$$\rho(\mathbf{K}_{p,1}) < 1 \quad \text{и} \quad F^T(x) / \pi_0(x) \in L_1.$$

С целью построения требуемого двойственного представления рассмотрим пространство \mathbf{L}_1 матриц-функций $\Psi^*(x)$ с нормой

$$\|\Psi^*\| = \int_X \sum_{i,j=1}^m |\Psi_{i,j}^*(x)| dx.$$

Для $\Psi^* \in \mathbf{L}_1$ введем линейный функционал

$$(\Psi^*, \Psi) = \int_X \text{tr}[\Psi^*(x) \Psi^T(x)] dx = \int_X \sum_{i,j=1}^m \Psi_{i,j}^*(x) \Psi_{i,j}(x) dx, \quad \Psi \in \mathbf{L}_\infty.$$

Определим также линейный оператор \mathbf{K}_p^* формулой

$$[\mathbf{K}_p^* \Psi^*](x) = \int_X \frac{K^T(y, x) \Psi^*(y) K(y, x)}{p(y, x)} dy$$

Поскольку $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$, то

$$\text{tr}(\Psi^* K \Psi^T K^T) = \text{tr}(K^T \Psi^* K \Psi^T).$$

Поэтому

$$(\Psi^*, \mathbf{K}_p \Psi) = (\mathbf{K}_p^* \Psi^*, \Psi).$$

Кроме того, выполняется неравенство

$$|(\Psi^*, \Psi)| \leq \|\Psi^*\|_{\mathbf{L}_1} \|\Psi\|_{\mathbf{L}_\infty}.$$

Следовательно

$$\|\mathbf{K}_p^*\|_{\mathbf{L}_1} = \|\mathbf{K}_p\|_{\mathbf{L}_\infty}, \quad \rho(\mathbf{K}_p^*) = \rho(\mathbf{K}_p).$$

Отметим, также, что оператор \mathbf{K}_p^* оставляет инвариантным конус $\mathbf{L}_1^+ \subset \mathbf{L}_1$ симметричных неотрицательно определенных матриц-функций, так как преобразование $K^T \Psi^* K$ сохраняет свойство неотрицательной определенности матриц Ψ^* .

Теорема 1. Пусть $\rho(\mathbf{K}_p) < 1$, $FF^T/\pi_0 \in \mathbf{L}_1$, $H \in L_\infty$.

Тогда

$$E\zeta^2 = (\Psi^*, H[2\Phi - H]^T) \quad (5)$$

где

$$\Psi^* = \mathbf{K}_p^* \Psi^* + FF^T/\pi_0,$$

причем $\Psi^* \in \mathbf{L}_1^+$.

Выражение (5) по форме совпадает с известным выражением величины $E\zeta^2$ для случая $m = 1$.

Полученное двойственное представление можно использовать для оптимизации оценки решения системы в целом, а также для оценки величины $\rho(\mathbf{K}_p)$ на основе теории малых возмущений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Михайлов Г. А., Медведев И. Н. Векторные оценки метода Монте-Карло: двойственные представления и оптимизация // Сиб. журн. выч. математики. 2010. Т. 13. С. 423–438.
2. Михайлов Г. А., Ухинов С. А. Двойственное представление среднего квадрата векторной оценки метода Монте-Карло // Доклады РАН. 2011. Т. 438, N 5.